

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)

Химический факультет



УТВЕРЖДАЮ:

И.о. декана химического факультета
_____ А.С. Князев

«*16*» *августа* 20 *22* г.

Рабочая программа дисциплины

Проблемы анализа многокомпонентных систем

по направлению подготовки

04.04.01 Химия

Направленность (профиль) подготовки:

**«Химические и физические методы исследований в экологической и
криминалистической экспертизе»**

Форма обучения

Очная

Квалификация

Магистр

Год приема

2022

Код дисциплины в учебном плане: ФТД.06

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ОП

_____ К.А. Дычко

Председатель УМК

_____ В.В. Хасанов

Томск – 2022

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

– ПК-1. Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИПК-1.1. Разрабатывает стратегию научных исследований, составляет общий план и детальные планы отдельных стадий.

ИПК-1.2. Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи, используя достижения современной химической науки, и исходя из имеющихся, материальных, информационных и временных ресурсов.

ИПК-1.3. Использует современное физико-химическое оборудование для получения и интерпретации достоверных результатов исследования в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках, применяя взаимодополняющие методы исследования.

2. Задачи освоения дисциплины

– Освоение магистрантом более глубоких знаний о взаимном влиянии компонентов в сложных реальных системах с целью управления аналитическими процессами, разработки новых методик анализа и исследования.

– Научиться устранять или учитывать это влияние, как основной источник систематической погрешности, овладение на этой основе методологией анализа и исследования объектов различной природы современными химическими и физико-химическими методами.

3. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к факультативным дисциплинам, предлагается обучающимся на выбор.

4. Семестр(ы) освоения и форма(ы) промежуточной аттестации по дисциплине

Третий семестр, зачет

5. Входные требования для освоения дисциплины

Для успешного освоения дисциплины студенты предварительно знакомятся с дисциплинами обязательной части профессионального блока: неорганическая, аналитическая, органическая, физическая химия, химия высокомолекулярных соединений, а также с дисциплинами обязательной части общепрофессионального блока: физика и строение вещества.

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 1 з.е., 36 часов, из которых:

-лекции: 12 ч.

-практические занятия: 20 ч.

в том числе практическая подготовка: 20 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины, структурированное по темам

Тема 1. Основные приемы анализа многокомпонентных объектов (измерение различных свойств, зависящих от состава образца, измерение одного и того же параметра при различных условиях, метод добавок, проведение предварительного разделения (выделения), использование более селективных методов анализа).

Устранение мешающих компонентов маскированием (связывание мешающего иона в прочный комплекс или малорастворимое соединение без отделения осадка, создание благоприятных условий регулированием рН, изменение степени окисления мешающего иона). Отделение мешающих компонентов на стадии пробоотбора и в процессе разложения образца (селективное растворение, селективное осаждение, последовательное осаждение). Классификация методов разделения (методы, основанные на образовании новой фазы, межфазного распределения, мембранные и внутрифазного распределения).

Применение селективных методов для анализа многокомпонентных систем. Метод пламенной атомно-абсорбционной спектроскопии. Основные принципы метода. Физико-химические процессы в пламени. Влияния при получении и переносе аэрозоля, в конденсированной фазе при испарении частиц (химические, структурные, косвенные влияния, тепловая блокировка), в газовой фазе. Способы учета, снижения и устранения влияний. Подготовка проб к анализу. Оптимизация анализа.

Метод дуговой атомно-эмиссионной спектроскопии (ДАЭС). Связь интенсивности спектральной линии с концентрацией элемента в облаке разряда, эффективными параметрами дуговой плазмы (температура, электронная концентрация) и параметрами, характеризующими поступление определяемых элементов в разряд (скорость испарения из электрода, коэффициент использования паров, среднее время пребывания частиц в плазме разряда). Фон в спектре разряда, его разновидности и причины возникновения. Способы устранения или учета взаимных влияний в методе АЭС: ускоренное испарение тонких слоев пробы, фракционное испарение, использование химических реакций в электродах, оптимизация электрических параметров дугового разряда, выбор линии сравнения и элемента – внутреннего стандарта, применение спектроскопических буферов и носителей, выбор стандартных образцов.

Тема 2. Применение химических, физико-химических и физических методов в комплексном исследовании многокомпонентных систем на примере торфа.

Физико-химические свойства торфа. Химический состав и структура торфа. Типы торфов, их особенности. Водные свойства торфа, надмолекулярные структуры. Кислотно-основные свойства торфа. Обменная емкость и константы ионизации торфа. Минеральная и органическая составляющая торфа. Кислотно-основное состояние поверхности торфа. Индикаторный метод. Функция Гаммета.

Равновесие ионного обмена на торфе. Исследование избирательности различных ионов M^{n+} и нефтепродуктов на торфе. Грануляция торфа. Модифицирование торфа. Исследование каталитической и сорбционной активности торфа по отношению к растворимым органическим веществам на торфе. Определение коэффициентов распределения и степени извлечения ионов и веществ. Влияние условий эксперимента (рН, концентрация, время контакта, масса навески, внешние воздействия) на степень извлечения веществ из водных сред. Кинетика ионного обмена на торфе. Определение лимитирующей стадии процесса поглощения ионов на торфе, расчет коэффициентов диффузии и энергии активации процесса.

Использование химических, физико-химических и физических методов исследования (спектрофотометрия, ИК спектроскопия, электронная микроскопия, элементный анализ, синхронный термический анализ и др.) для исследования состава, структуры и природы функциональных групп торфа.

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине «Проблемы анализа многокомпонентных систем» проводится путем контроля посещаемости, защиты индивидуального задания и фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр.

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Зачет в третьем семестре проводится в письменной форме по билетам. Билет содержит два теоретических вопроса и задачу. Продолжительность зачета 1,5 часа.

Два задания теоретического характера носят проблемный характер и предполагают синтетические ответы в развернутой форме, проверяющие ИПК-1.1, ИПК-1.3.

Третье задание – расчетная задача. Выполнение данного задания предполагает проверку компетенции ИПК-1.2. Приводится решение задачи и краткая интерпретация полученных результатов.

Примерные варианты билетов:

Билет №4

1. Чем обусловлена минеральная и органическая составляющие торфа? Какие методы позволяют их определить? За счет каких положительных свойств торфа его можно модифицировать? Какую цель при этом преследуют? По какой причине торф гранулируют? Что для этого используют?
 2. Какие химические реакции, протекающие в электродах, могут оказать существенное влияние на результаты атомно-эмиссионного анализа с дуговым источником возбуждения?
 3. Два образца нефти (стандартный и анализируемый) одинаковой массой по 1,0000 г разбавили в 10 раз метилизобутилкетонем и распылили в пламени атомно-абсорбционного спектрофотометра. Оптическая плотность образца с содержанием ванадия 0,10 % равна $A_{ст} = 0,740$, анализируемого образца $A_x = 0,520$.
 - а) Какие факторы влияют на аналитический сигнал определяемого элемента при анализе нефти?
 - б) Какой прием используется для их устранения?
 - в) Какова массовая доля ванадия (%) в нефти?
- (вес вопросов в билетах: 1 – 25 баллов, 2 – 25 баллов, 3 – 50 баллов. В сумме – 100 баллов)

Билет №2

1. Как подготовить торф к анализу? Почему нельзя сушить торф/почву в сушильном шкафу до постоянной массы? Какие процессы могут при этом происходить? Какое время является оптимальным для просушивания? Что такое полная обменная емкость и как она может быть определена? Укажите методику.
2. Охарактеризуйте основные приемы количественного анализа многокомпонентных объектов (измерение различных свойств, зависящих от состава образца, измерение одного и того же параметра при различных условиях, метод добавок, проведение предварительного разделения (выделения), использование более селективных методов анализа).
3. При определении цинка в алюминии методом атомной абсорбционной спектроскопии построили градуировочный график по следующим данным:

$c(\text{Zn}^{2+}), \text{мкг/см}^3$	0,30	0,50	0,80	2,00
Атомное поглощение	14,0	23,0	32,6	81,5

Навеску анализируемого металла (масса 0,6055 г) растворили в смеси кислот, перенесли в мерную колбу вместимостью 100,0 см³, разбавили дистиллированной водой до метки. Атомное поглощение в условиях фотометрирования стандартного раствора ($\lambda = 285,2 \text{ нм}$) составило 28,0 делений шкалы прибора.

- а) Найдите массовую долю цинка в алюминии.

б) Какие возможны систематические погрешности в случае приведенного хода анализа.

в) Какие правила техники безопасности необходимо соблюдать при проведении этого анализа?

(вес вопросов в билетах: 1 – 25 баллов, 2 – 25 баллов, 3 – 50 баллов. В сумме – 100 баллов)

Шкала оценивания ответов на вопросы билетов

№ вопроса	Оценивание ответов на вопросы в баллах			
	1,2	3	4	5
1	< 14	15–18	19–21	22–25
2	< 14	15–18	19–21	22–25
3	< 29	30–36	37–44	45–50
Сумма баллов	< 57	58–72	73–86	87–100

Результаты промежуточной аттестации зависят и учитывают результаты текущего контроля (защита индивидуального задания). Цель выполнения творческого ИЗ – освоение магистрантом основных этапов методологической деятельности при анализе и исследовании сложных реальных объектов. Зная сущность и теоретические основы инструментальных методов идентификации и количественного определения веществ, особенности реальных объектов, магистрант должен осуществлять выбор варианта метода и применить его на практике для выявления тех или иных признаков исследуемых объектов (состав, структура и др.), провести анализ полученных результатов и сформулировать выводы.

Преподаватель формулирует тему индивидуального творческого задания исходя из темы научно-исследовательской работы. Его выполнение предполагает моделирование условий эксперимента по теме магистерской диссертации, практическую реализацию результатов моделирования. Защищают индивидуальное задание в студенческой группе в форме конференции с презентацией доклада.

Примерные темы индивидуальных заданий:

1. Торф – сорбент ионов цветных и тяжелых металлов.
2. Использование торфа для очистки сточных вод от нефтепродуктов.
3. Способы учета взаимных влияний при анализе сложных лекарственных средств или пищевых продуктов методом молекулярной абсорбционной спектrophотометрии.
4. Подготовка природной воды к элементному анализу методом атомно-эмиссионной спектроскопии с дуговым источником возбуждения. Возможность применения стандартных образцов на основе графитового порошка ГСОРМ -37.

Выполнение индивидуального задания проверяет ИПК-1.1. и максимально оценивается 100 баллов.

Результаты промежуточной аттестации с учетом текущего контроля оцениваются следующим образом:

Итоговая шкала промежуточной аттестации

Количество баллов	<120	121–150	151–185	186–200
Оценка	1,2	3	4	5
Вывод о сформированности компетенций ПК–1.1 и 1.2	Не сформированы	Частично сформированы	Фрагментарно сформированы	Полностью сформированы
	Не зачтено	Зачтено		

11. Учебно-методическое обеспечение

а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» - <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=22078>

б) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.

б) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.

в) План лекционных / практических занятий по дисциплине.

г) Темы индивидуальных заданий

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

а) основная литература:

– Naumova L. B., Batalova V. N., Gorlenko N. P., Kartashova A. A. Study of Absorption of Organic Pollutants by Modified Natural Materials. Key Engineering Materials Submitted. 2016. Vol. 683. pp 275–280.

– Parson, William W. Modern Optical Spectroscopy electronic resource: With Exercises and Examples from Biophysics and Biochemistry. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg.: Imprint: Springer, 2015. 572 p.

– Ludmila Naumova, Nikolay Gorlenko and Irina Kurzina. Photocatalytic Activity of the Iron- Containing Natural Composites in the Reaction of Oxidative Destruction of Oxalic Acid and Phenol. Environments 2018, 5, 16; doi:10.3390/environments5010016.

– Другов Ю. С. Анализ загрязненной почвы и опасных отходов : практическое руководство / Другов Ю. С., Родин А. А.. – М. : Лаборатория знаний, 2020. – 472 с. URL: <https://e.lanbook.com/book/135483>. URL: <https://e.lanbook.com/img/cover/book/135483.jpg>

б) дополнительная литература:

– Москвин Л., Родинков О. Методы разделения и концентрирования в аналитической химии. Долгопрудный : Интеллект. 2012. – 352 с.

– Васильева В. И., Стоянова О. Ф., Шкутина И. В., Карпов С. И. Спектральные методы анализа: практическое руководство. Санкт-Петербург [и др.]: Лань, 2014. – 416 с.

– Ганеев А. А., Шолупов С. Е., Пупышев А. А. и др. Атомно-абсорбционный анализ: учебное пособие. Санкт-Петербург [и др.]: Лань. 2011. – 304 с.

– Савинов С. С. Новые возможности дуговой атомно-эмиссионной спектрометрии для прямого анализа жидких биопроб. Автореферат диссертации на соискание ученой степени канд. хим. наук. Санкт-Петербург. 2014. – 21 с.

– Отмахов В. И. Метод дуговой атомной спектрометрии с многоканальным анализатором эмиссионных спектров (Учебно-методическое пособие). В. И. Отмахов, Е. В. Петрова. Томск : РИО ТГУ. 2014. – 75 с.

в) ресурсы сети Интернет:

– открытые онлайн-курсы

– Другов Ю. С. Анализ загрязненной почвы и опасных отходов : практическое руководство / Другов Ю. С., Родин А. А.. – М. : Лаборатория знаний, 2020. – 472 с. URL: <https://e.lanbook.com/book/135483>. URL: <https://e.lanbook.com/img/cover/book/135483.jpg>

– William W. Parson. Modern Optical Spectroscopy electronic resource : With Exercises and Examples from Biophysics and Biochemistry /Parson, William W. Berlin, Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg : Imprint: Springer, 2015. 572 p. Электронный ресурс <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-662-46777-0>

– <http://sun.tsu.ru/limit/2016/000385853/000385853.djvu> онлайнвые учебно-методические материалы по курсу «Физические методы исследования»;

– <http://edu.tsu.ru/eor/resource/557/tpl/index.html>– онлайнвые учебно-методические материалы по курсу «Физические методы исследования»

– http://www.vmk.ru/product/programmnoe_obespechenie/atom.html Программное обеспечение атомно-эмиссионного спектрального анализа. Программа «Атом».

13. Перечень информационных технологий

- а) лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:
- Microsoft Office Standart 2013 Russian: пакет программ. Включает приложения: MS Office Word, MS Office Excel, MS Office PowerPoint, MS Office On-eNote, MS Office Publisher, MS Outlook, MS Office Web Apps (Word Excel MS PowerPoint Outlook);
 - публично доступные облачные технологии (Google Docs, Яндекс диск и т.п.).

б) информационные справочные системы:

- Электронный каталог Научной библиотеки ТГУ – <http://chamo.lib.tsu.ru/search/query?locale=ru&theme=system>
- Электронная библиотека (репозиторий) ТГУ – <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index>
- ЭБС Лань – <http://e.lanbook.com/>
- ЭБС Консультант студента – <http://www.studentlibrary.ru/>
- Образовательная платформа Юрайт – <https://urait.ru/>
- ЭБС ZNANIUM.com – <https://znanium.com/>
- ЭБС IPRbooks – <http://www.iprbookshop.ru/>

14. Материально-техническое обеспечение

Аудитории для проведения занятий лекционного типа.

Аудитории для проведения занятий семинарского типа, индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации.

Помещения для самостоятельной работы, оснащенные компьютерной техникой и доступом к сети Интернет, в электронную информационно-образовательную среду и к информационным справочным системам.

Обучение по дисциплине «Проблемы анализа многокомпонентных систем» осуществляется на базе:

- лабораторная аудитория (№ 213, 6-го учебного корпуса ТГУ)
- спектральная лаборатория (№ 319, 6-го учебного корпуса ТГУ).

Все лаборатории оснащены вытяжными шкафами, стеклянной и фарфоровой лабораторной посудой, измерительным инструментом (весы, термометры, рН-метры, УФ-спектрофотометр и т.д.). Кроме того, в лабораториях имеется нагревательное оборудование (электроплитки и термостатирующие шкафы), и другое оборудование.

Учебный процесс по дисциплине «Проблемы анализа многокомпонентных систем» поддерживается самым современным оборудованием.

1. Атомно-эмиссионный спектрометр "Гранд" с многоканальным анализатором эмиссионных спектров в комплексе с полихроматором «Роуланда» и генератором «Везувий», Россия, НПО «Оптоэлектроника».
2. Дифракционный атомно-эмиссионный спектрометр ДФС-452, совмещенный с МАЭС.
3. Спектрофотометры «Evolution 600» USA, «Specol»; СФ-56.
4. Атомно-абсорбционный спектрометр SOLAAR S2 Thermoelectron Corporation (США).
5. Аналитические весы АДВ-200.
6. Спектрометр EDX Pocket Series (SkyrayInstrument, КНР)

15. Информация о разработчиках

Петрова Елена Васильевна, канд. хим. наук, доцент, кафедра аналитической химии Национального исследовательского Томского государственного университета, доцент.

Наумова Людмила Борисовна, канд. хим. наук, доцент, кафедра аналитической химии Национального исследовательского Томского государственного университета, доцент.